

# Li“洞原子”高位三激发态 $^2S(m)$ 和 $^2D(m)$ ( $m = 2-7$ )的能级、精细结构和 Auger 宽度\*

孙 言<sup>†</sup> 苟秉聪 朱婧晶

(北京理工大学物理系, 北京 100081)

(2009 年 8 月 31 日收到; 2010 年 1 月 6 日收到修改稿)

采用鞍点变分方法和鞍点复数转动方法, 考虑了相对论修正、质量极化修正等基础上, 计算了 Li“洞原子”高位三激发态  $2l2l'nl''^2S(m)$  和  $^2D(m)$  ( $m = 2-7$ ) 高根系列的高精度波函数、相对论能量、精细结构, 同时还计算了 Auger 分宽度和总宽度, 通过相对论效应的讨论, 对  $^2S(7)$ ,  $^2D(6)$  及  $^2D(7)$  的组态进行了重新标定.

**关键词:** 鞍点复数转动, 相对论修正, 精细结构, Auger 宽度

**PACC:** 3150, 3130, 3280D, 3130J

## 1. 引 言

原子内壳层高位激发态是当前国际原子分子物理学研究的前沿课题, 随着同步辐射和探测技术的进步, 人们已获得了高质量的 Li“洞原子”态的实验结果. Li 原子三激发态系列是复杂的四体库仑原子系统, 电子关联效应十分复杂, 它的两个  $1s$  轨道均是空的, 原子处于共振态, 存在一定概率的自电离, 并且这些自电离共振态具有能级高、态密度高、每一个态有无穷多个衰变通道的特点, 考察“洞原子”要求实验高分辨率、理论高精度. 此课题的研究对考察高激发态原子与分子理论和电子关联效应具有重要的学术意义, 对高温等离子体诊断、天体物理、核聚变、软 X 射线激光等领域均有很好的应用前景.

随着 20 世纪 60 年代束箔技术的出现<sup>[1,2]</sup> 及发展, Li 原子三激发态的研究很快引起实验<sup>[3-12]</sup> 和理论<sup>[9,11,12,13-24]</sup> 工作者的广泛关注. 1975 年, Bruch 等<sup>[3,4]</sup> 最先在束箔实验中观察到 Li  $2l^22l'$  三激发态. 之后 Agentoft 和 Mannervik 等在实验中观察到 Li 的  $2p2p2p^4S^o$  等态<sup>[5,6]</sup>. Muller 等<sup>[7]</sup> 在碰撞实验中测量了 Li 的三激发态  $2s^22p^2P^o$  和  $2s2p^2^2D^o$ . Kiernan

等<sup>[8]</sup> 利用光激发实验测量了 Li  $2s^22p^2P^o$  三激发态的能级和宽度. 1996 年, Journal 等<sup>[9]</sup> 首次进行了 Li 三激发态附近的光电离截面的测量, 文献[10-12] 进行了更高精度的  $Li^2 P^o$ ,  $^2S^o$  和  $^2P$  等三激发态的能量和宽度的实验测量. 在理论方面, 早期, Ahmed 和 Lipsky<sup>[13]</sup> 采用组态相互作用 (CI) 方法计算了类 Li 系统的三激发态能量. 之后, 一些理论工作者采用了 Hartree-Fock CI 方法<sup>[14]</sup>、多组态 Dirac-Fock 方法<sup>[11]</sup>、 $R$  矩阵<sup>[9,12,15-17]</sup> 和确定组态理论<sup>[18]</sup> 等方法进行了计算, 与实验结果符合很好. 文献[19-25] 采用截断对角化方法 (TDM)、密度泛函理论 (DFT) 和鞍点复数转动方法, 计算了 Li 三激发态的能量和寿命, 得到更加精确的理论计算结果. 然而这些工作大多研究的是  $2l2l'nl''$  ( $n = 2$ ) 三激发态, 而对  $2l2l'nl''$  ( $n > 2$ ) 高根态的工作却开展很少.

本文采用鞍点变分方法和鞍点复数转动方法, 利用截断变分方法进一步饱和波函数空间, 在考虑相对论修正和质量极化效应的基础上, 计算了 Li 原子高位三激发态  $2l2l'nl''^2S(m)$  和  $^2D(m)$  ( $m = 2-7$ ) 高根系列的波函数、相对论能量、精细结构, 同时还计算了 Li 原子三激发态高根系列的 Auger 跃迁宽度. 本文的理论计算结果对光谱的实验研究是有意义的.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10674015) 资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: suenyangu@163.com

## 2. 理论方法

在角动量自旋表象下, Li 原子的非相对论哈密顿算符为(除特别说明外, 本文均使用原子单位)

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^3 \left[ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^3 \frac{1}{r_{ij}}. \quad (1)$$

闭通道的波函数  $\Psi_b$  可表示为

$$\begin{aligned} \Psi_b(1,2,3) = & A \sum C_{mnk}^{l_1 l_2 l_3} [1 - P(r_1)] [1 - P(r_2)] \\ & \times [1 - P(r_3)] \phi_{mnk}(r_1, r_2, r_3) Y_{l_1 l_2 l_3}^{LM} \\ & \times (r_1, r_2, r_3) \chi(1,2,3), \quad (2) \end{aligned}$$

式中  $A$  为反对称化算符. 径向部分波函数采用 Slater 型基函数展开, 即

$$\begin{aligned} \phi_{mnk}(r_1, r_2, r_3) = & r_1^m r_2^n r_3^k \exp(-\alpha_i r_i \\ & - \beta_i r_2 - \gamma_i r_3), \quad (3) \end{aligned}$$

其中  $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$  是非线性参数, 它们与线性参数  $C_i$  可由变分优化能量极小获得. (2) 式中投影算符为

$$P(r_i) = |\phi_0(r_i)\rangle \langle \phi_0(r_i)|. \quad (4)$$

空轨道波函数取为

$$\phi_0(r) = \left( \frac{q}{\pi} \right)^{1/2} \exp(-qr), \quad (5)$$

式中  $q$  为非线性参数, 采用鞍点变分方法, 通过优化能量极大来确定  $q$  的值. 于是利用鞍点变分法, 由波函数  $\Psi_b$  所获得的能量  $E_b$  就是共振态的鞍点能量.

为了获得高精度的波函数, 进一步饱和束缚函数空间, 采用截断变分方法得到能量的改进量  $\Delta E_{RV}$ , 总的非相对论能量为

$$E_{\text{nonrel}} = E_b + \Delta E_{RV}. \quad (6)$$

为了进一步获得高精度的能量计算值, 还需要考虑相对论修正和质量极化效应. 相对论微扰算符包括动能修正项、Darwin 项、电子与电子接触项和轨道与轨道相互作用项. 相对论微扰项和质量极化效应均计算到一级, 这些相对论微扰算符和质量极化算符在文献[26]中有详细描述, 这里不再赘述.

在 Pauli-Breit 相对论近似下, 精细结构的能量微扰算符为

$$H_{\text{FS}} = H_{\text{SO}} + H_{\text{SOO}} + H_{\text{SS}}.$$

这里  $H_{\text{SO}}$  为自旋与轨道相互作用项,

$$H_{\text{SO}} = \frac{Z}{2c^2} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i}{r_i^3}; \quad (7)$$

$H_{\text{SOO}}$  为自旋与其他轨道相互作用项,

$$H_{\text{SOO}} = -\frac{1}{2c^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \left[ \frac{1}{r_{ij}^3} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \mathbf{p}_i \right]$$

$$\cdot (\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j); \quad (8)$$

$H_{\text{SS}}$  为自旋与自旋相互作用项,

$$\begin{aligned} H_{\text{SS}} = & -\frac{1}{c^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \\ & \times \left[ \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \frac{3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

(7)–(9) 式中的  $\mathbf{l}_i, \mathbf{s}_i$  分别为第  $i$  个电子的轨道和自旋角动量. 以上精细结构项均计算到一级微扰.

考虑束缚空间与连续空间的相互作用, 采用鞍点复数转动方法计算 Auger 位移和宽度. 总波函数写作

$$\begin{aligned} \Psi(1,2,3) = & \Psi_b(1,2,3) \\ & + A \sum_i \phi_i(1,2) U_i(3), \quad (10) \end{aligned}$$

其中  $\phi_i(1,2)$  是开通道的靶态,  $U_i$  为离化自由电子波函数.

$$U_i = \sum_n d_{i,n} r^n e^{-\alpha r}, \quad (11)$$

其中  $r$  为复数标度. 计算时,  $\Psi_b(1,2,3)$  中的非线性参数保留, 但线性参数重新计算, 从而包括了束缚空间和连续空间的相互作用. 从波函数  $\Psi(1,2,3)$  得到  $E - i\Gamma/2$ , 其中  $E$  是共振态的能量,  $\Gamma$  为宽度, 由束缚空间  $\Psi_b(1,2,3)$  与连续空间的相互作用所得到的能量  $E_s = E - E_b$  称为位移.

## 3. 结果及讨论

表 1 给出了 Li 原子高位三激发态  $2l2l'nl''^2S(m)$  和  $^2D(m)$  ( $m=2-7$ ) 系列的非相对论能量. 变分波函数采用 Slater 型基函数, 线性参数取值范围从 671 到 1076, 角动量自旋分波的个数从 26 到 43. Li“洞原子”三激发态的三个电子均在  $K$  壳层之外, 形成  $1s^2$  空轨道. 在计算过程中对应每一个角度自旋成分, 实轨道非线性参数和线性参数由优化能量极小获得, 空轨道的非线性参数由优化能量极大获得. 通过截断变分方法进一步饱和波函数空间, 可得到能量改进量  $\Delta E_{RV}$ , 改进范围从  $82 \times 10^{-6}$  到  $103 \times 10^{-6}$ . 与其他文献的计算结果进行比较表明, 本文计算的能量有一定的改进. 如表 1 中本文计算得到 Li 的  $^2S(3)$  和  $^2D(4)$  态的能量值分别为  $-1.956559$ ,  $-1.939061$ , 比 Conneely 等<sup>[20]</sup> 采用 TDM 的理论计算值  $-1.950938$ ,  $-1.931865$  分别改进了约 0.0056 和 0.0072, 比 Roy<sup>[21]</sup> 采用 DFT 的理论计算值  $-1.9402$ ,  $-1.9202$  分别改进了约 0.0164 和 0.0189.

表 1 Li“洞原子”三激发态 ${}^2S(m)$ 和 ${}^2D(m)$  ( $m=2-7$ )系列的非相对论能量  $E_{\text{nonrel}}$ 

共振态	$q$	$E_b$	$\Delta E_{RV}$	本工作	文献[20]	文献[24]	文献[21]
$2s2s3s\ {}^2S(2)$	2.912	-2.010405	-0.000084	-2.010489	-2.004837	-2.010498	-1.9871
$2s2s4s\ {}^2S(3)$	2.912	-1.956471	-0.000088	-1.956559	-1.950938	-1.956534	-1.9402
$2s2p3p\ {}^2S(4)$	2.913	-1.947633	-0.000092	-1.947725	-1.941499	-1.947783	
$2s2s5s\ {}^2S(5)$	2.903	-1.931778	-0.000090	-1.931868	-1.926483		-1.9194
$2s2s6s\ {}^2S(6)$	2.912	-1.917600	-0.000087	-1.917687	-1.916524		-1.9094
$2s2p4p\ {}^2S(7)$	2.910	-1.915189	-0.000089	-1.915278	-1.911052		
$2s2s3d\ {}^2D(2)$	2.914	-1.966231	-0.000097	-1.966328	-1.961412	-1.966312	-1.9461
$2s2p3p\ {}^2D(3)$	2.908	-1.958072	-0.000087	-1.958159	-1.952783	-1.958314	
$2s2s4d\ {}^2D(4)$	2.913	-1.938968	-0.000093	-1.939061	-1.931865		-1.9202
$2s2s5d\ {}^2D(5)$	2.913	-1.926956	-0.000083	-1.927039	-1.919264		-1.9100
$2s2s6d\ {}^2D(6)$	2.913	-1.920472	-0.000090	-1.920562	-1.913228		-1.9035
$2s2s7d\ {}^2D(7)$	2.914	-1.915508	-0.000081	-1.915589	-1.912031		-1.8995

为了获得更高精度的能量值,本文还计算了相对论的一级微扰修正和质量极化效应的一级修正,其中相对论微扰算符包括动能修正项、Darwin项、电子与电子接触项和轨道与轨道相互作用项,计算结果列于表2.与文献[13,19]分别采用CI方法和TDM方法的计算结果相比较,本文的结果也有很好的改进.在计算过程中,本文比Zhang等<sup>[24]</sup>选取了更多的分波数和组态项,因此计算的结果也更低些.高根Rydberg系列的一个重要问题是确定其主要的组态结构,高根系列的每个态的主要组态结构可近似地由以下三个因素确定:能量值、角度自旋分波对归一化的相对贡献、相对论修正效应大小的对比.一般而言,共振态 $2s2snl$ 的相对论修正要比 $2s2pnl$ 态大,而 $2s2pnl$ 态的相对论修

正又要比 $2p2pnl$ 态大.本工作通过考察角度自旋分波对归一化的相对贡献,发现 ${}^2S(7)$ 态中主要组态结构的角度自旋分波011(spp)占95.32%; ${}^2D(6)$ 态中002(ssd)分波占73.41%; ${}^2D(7)$ 态中002(ssd)分波占73.69%.与文献[20]不同,本文认为 ${}^2S(7)$ 态的主要组态结构为 $2s2p4p$ 而不是 $2s2s7s$ , ${}^2D(6)$ 态的主要组态结构为 $2s2s6d$ 而不是 $2s2p4p$ , ${}^2D(7)$ 态的主要组态结构为 $2s2s7d$ 而不是 $2s2s6d$ .进一步通过比较相对论效应修正的大小, ${}^2S(7)$ 比 ${}^2S(m)$ 高根系列的其他相对论效应修正值均小,因此这里标定 ${}^2S(7)$ 态的主要组态结构为 $2s2p4p$ 是合理的.同理, ${}^2D(6)$ 态的相对论效应修正较大,因此标定其主要组态结构为 $2s2s6d$ 也是合理的.

表 2 Li“洞原子”的三激发态 ${}^2S(m)$ 和 ${}^2D(m)$  ( $m=2-7$ )系列的质量极化修正  $H_{\text{mp}}$ 和相对论修正  $H_{\text{rel}}$ 以及总能量  $E_{\text{total}}$ 

共振态	$E_{\text{nonrel}}$	$\langle H_{\text{mp}} \rangle$	$\langle H_{\text{rel}} \rangle$	$E_{\text{total}}$ (本工作)	$E_{\text{total}}$ (文献[13])	$E_{\text{total}}$ (文献[19])	$E_{\text{total}}$ (文献[24])
$2s2s3s\ {}^2S(2)$	-2.010489	-0.80	-245.05	-2.010735	-2.000671	-1.98978	-2.010406
$2s2s4s\ {}^2S(3)$	-1.956559	-0.21	-233.39	-1.956793	-1.946582		-1.956381
$2s2p3p\ {}^2S(4)$	-1.947725	1.67	-197.98	-1.947921	-1.935286		-1.947704
$2s2s5s\ {}^2S(5)$	-1.931868	-0.22	-221.33	-1.932090	-1.876317		
$2s2s6s\ {}^2S(6)$	-1.917687	-0.26	-217.40	-1.917905	-1.835791		
$2s2p4p\ {}^2S(7)$	-1.915278	1.26	-194.95	-1.915472	-1.801004		
$2s2s3d\ {}^2D(2)$	-1.966328	1.14	-231.2	-1.966558		-1.95645	-1.966134
$2s2p3p\ {}^2D(3)$	-1.958159	1.24	-195.32	-1.958353			-1.958260
$2s2s4d\ {}^2D(4)$	-1.939061	-0.08	-234.09	-1.939295			
$2s2s5d\ {}^2D(5)$	-1.927039	-0.13	-234.83	-1.927274			
$2s2s6d\ {}^2D(6)$	-1.920562	-0.18	-235.12	-1.920797			
$2s2s7d\ {}^2D(7)$	-1.915589	-0.87	-240.04	-1.915831			

考虑自旋与轨道、自旋与其他轨道和自旋与自旋的相互作用,本文还计算了该系统的精细结构能级.表3列出Li“洞原子”的三激发态 $^2D(m)$  ( $m=2-7$ )系列的每个组态对不同 $J$ 的权重中心能量位移 $\Delta E_J$ 的精细结构能量值和能级劈裂值 $\nu_{2.5-1.5}$ .据资料显示, Li“洞原子”高位三激发

$^2D(m)$  ( $m=2-7$ )共振态的精细结构至今还没有被报道过.精细结构劈裂值随 $m$ 的变化如图1所示,其值在 $m=3$ 处发生突变,表明了与 $^2D(2)$ 和 $^2D(4)$ 相比, $^2D(3)$ 的主要组态结构发生了变化,这与之前本文分析的高根系列的主要组态的变化规律是一致的.

表3 Li“洞原子”的三激发态 $^2D(m)$  ( $m=2-7$ )系列的精细结构能量 $\Delta E_J$ 及精细结构劈裂 $\nu_{2.5-1.5}$  ( $E_{CG}$ 为权重中心能量)

共振态	$E_{CG}$	$\Delta E_{J=1.5}/10^{-6}$	$\Delta E_{J=2.5}/10^{-6}$	$\nu_{2.5-1.5}/\text{cm}^{-1}$
2s2s3d $^2D(2)$	-1.966558	-3.32	2.22	1.22
2s2p3p $^2D(3)$	-1.958353	-30.06	20.04	10.99
2s2s4d $^2D(4)$	-1.939295	-0.32	2.15	1.18
2s2s5d $^2D(5)$	-1.927274	-0.18	0.12	0.07
2s2s6d $^2D(6)$	-1.920797	-0.26	0.17	0.09
2s2s7d $^2D(7)$	-1.915830	-0.44	0.29	0.16

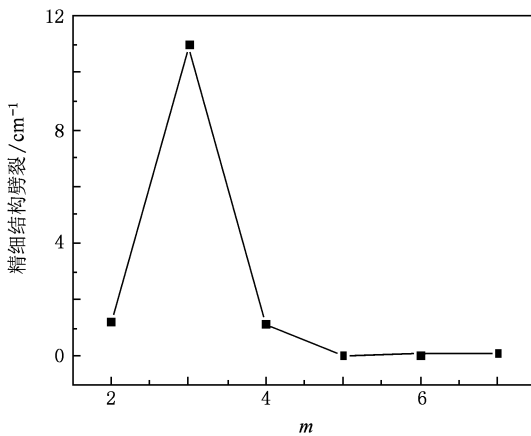


图1 Li“洞原子”高位三激发态系列 $^2D(m)$  ( $m=2-7$ )的精细结构劈裂随 $m$ 的变化

表4和表5给出了Li原子的高位三激发态 $^2S(m)$ 和 $^2D(m)$  ( $m=2-7$ )高根系列的Auger分宽度和总宽度. Li原子的高位三激发态位于多重电离阈之上,因此每个共振态具有无穷多个衰变通道. Auger过程是由两个电子的相互作用引起的,其中一个电子摆脱原子核的束缚成为自由电子,另外一个电子落到内壳层空轨道,即产生了自电离过程.虽然对于每个共振态可能具有无穷多个衰变通道,但是由于库仑相互作用是来自两个电子之间的相互作用,大多数的开通道不同于 $2|2l'nl''$  ( $n>2$ )初态的组态,它们对Auger宽度的贡献很小,因此表4仅列出了一些主要开通道的Auger分宽度.对于某个给定的共振态,只有一些特定的开通道是主要的,并且它们的数目取决于共振态的对称性.例如,对

于 $2s2s3s$   $^2S(2)$ 共振态,只有以下五个通道是主要的:  $1s2s$   $^1\text{ }^3S + ks$ ,  $1s3s$   $^1\text{ }^3S + ks$ ,  $1s4s$   $^3S + ks$ , 其中,  $1s3s$   $^1\text{ }^3S + ks$ 为最主要的通道.将本文的数据与文献[24]的理论数据相比较,两者符合较好.例如,本文计算的 $2s2s3s$   $^2S(2)$ 态的Auger总宽度为144.02 meV,主要通道 $1s3s$   $^1\text{ }^3S + ks$ 的Auger分宽度分别为29.76, 87.99 meV,这与文献[24]的数据(137.79, 29.19, 87.77 meV)符合较好.通过表4可以发现:随着初态 $m$ 值的增大,能级增高,其开通道 $1snl$   $^1\text{ }^3L + e$ 中 $n$ 较大的一些通道也成为主要的开通道. Berrington等<sup>[17]</sup>采用 $R$ 矩阵方法计算时,其开通道 $1snl$   $^1\text{ }^3L + e$ 中没有包含这些 $n$ 较大的开通道,因此随着 $m$ 的增加,文献[17]计算的Auger总宽度值要比本文的结果偏低些.如表5所列,本文计算的 $2s2s3s$   $^2S(2)$ 态的Auger总宽度为144.02 meV,文献[17]计算的总宽度为141 meV,符合较好;本文计算的 $2s2s5s$   $^2S(5)$ 态的Auger总宽度为113.27 meV,而文献[17]的结果为8.2 meV,相差较大.至今,对于Li原子高位三激发态 $^2S(m)$  ( $m=5-6$ )和 $^2D(m)$  ( $m=4-6$ )态的Auger宽度的报道还很少,本文计算所得数据对将来研究Auger光谱是有用的.

从表4和表5中的数据可以看出:高根系列随着根的升高,共振态高根系列的Auger总宽度整体上呈下降趋势.在高根系列组态结构突变处, Auger总宽度和主要的通道也发生突变.例如:对于 $2s2s4s$   $^2S(3)$ 共振态,主要的Auger通道为

表 4 Li 原子高位三激发态 $^2S(m), ^2D(m)$  ( $m=2-7$ )高根系列的 Auger 分宽度(单位为 meV)

共振态	Auger 分宽度							数据来源
$2s2s3s\ ^2S(2)$	$1s2s\ ^1S$	$1s2s\ ^3S$	$1s3s\ ^1S$	$1s3s\ ^3S$	$1s4s\ ^1S$	$1s4s\ ^3S$	$1s2p\ ^3P$	本 文 文献[24]
	4.75	5.42	29.76	87.99	1.86	11.34	2.90	
	4.10	5.36	29.19	87.77		11.37		
$2s2s4s\ ^2S(3)$	$1s2s\ ^3S$	$1s3s\ ^3S$	$1s4s\ ^1S$	$1s4s\ ^3S$	$1s5s\ ^1S$	$1s5s\ ^3S$		本 文 文献[24]
	4.15	2.28	25.93	67.36	3.28	32.50		
	4.50	2.17	25.80	68.93	7.57	32.47		
$2s2p3p\ ^2S(4)$	$1s3s\ ^3S$	$1s4s\ ^3S$	$1s5s\ ^1S$	$1s5s\ ^3S$	$1s2p\ ^3P$	$1s3p\ ^1P$	$1s4p\ ^1P$	本 文 文献[24]
	1.30	3.55	3.13	12.60	2.82	5.00	2.16	
	1.32	3.45	3.76	13.54	2.81	5.00	2.14	
$2s2s5s\ ^2S(5)$	$1s2s\ ^3S$	$1s4s\ ^1S$	$1s4s\ ^3S$	$1s5s\ ^1S$	$1s5s\ ^3S$	$1s6s\ ^1S$	$1s6s\ ^3S$	本 文
	1.43	4.12	13.37	1.60	12.96	18.77	61.02	
$2s2s6s\ ^2S(6)$	$1s2s\ ^1S$	$1s2s\ ^3S$	$1s4s\ ^1S$	$1s4s\ ^3S$	$1s5s\ ^1S$	$1s5s\ ^3S$		本 文
	1.78	2.25	2.01	7.45	1.93	13.57		
$2s2p4p\ ^2S(7)$	$1s6s\ ^3S$	$1s2p\ ^3P$	$1s3p\ ^1P$	$1s4p\ ^1P$	$1s5p\ ^1P$	$1s5p\ ^3P$		本 文
	1.05	1.02	1.14	1.33	4.62	2.01		
$2s2s3d\ ^2D(2)$	$1s3p\ ^1P$	$1s3d\ ^1D$	$1s3d\ ^3D$	$1s4d\ ^1D$	$1s4d\ ^3D$	$1s5d\ ^1D$	$1s5d\ ^3D$	本 文 文献[24]
	0.95	19.98	60.84	31.35	44.99	0.20	0.63	
	0.91	19.94	60.63	14.76	44.40	0.21	0.63	
$2s2p3p\ ^2D(3)$	$1s2s\ ^3S$	$1s2p\ ^3P$	$1s3p\ ^1P$	$1s4p\ ^1P$	$1s3d\ ^3D$	$1s4d\ ^1D$	$1s4d\ ^3D$	本 文 文献[24]
	5.97	2.26	5.43	1.16	2.79	2.88	8.65	
	2.12	2.25	5.43		2.71	2.75	8.23	
$2s2s4d\ ^2D(4)$	$1s3d\ ^1D$	$1s3d\ ^3D$	$1s4d\ ^3D$	$1s5d\ ^1D$	$1s5d\ ^3D$	$1s6d\ ^3D$	$1s8d\ ^3D$	本 文
	4.42	13.40	9.32	27.10	81.81	10.80	9.45	
$2s2s5d\ ^2D(5)$	$1s3d\ ^3D$	$1s4d\ ^3D$	$1s6d\ ^1D$	$1s6d\ ^3D$	$1s7d\ ^1D$	$1s7d\ ^3D$	$1s8d\ ^3D$	本 文
	5.16	6.32	21.67	65.98	11.92	35.62	6.35	
$2s2s6d\ ^2D(6)$	$1s3d\ ^3D$	$1s4d\ ^3D$	$1s6d\ ^1D$	$1s6d\ ^3D$	$1s7d\ ^1D$	$1s7d\ ^3D$	$1s8d\ ^3D$	本 文
	2.98	4.42	5.56	16.90	9.47	28.97	4.44	
$2s2s7d\ ^2D(7)$	$1s3d\ ^3D$	$1s4d\ ^3D$	$1s6d\ ^1D$	$1s6d\ ^3D$	$1s7d\ ^1D$	$1s7d\ ^3D$	$1s8d\ ^3D$	本 文
	1.89	3.43	1.45	4.44	6.35	19.52	3.74	

表 5 Li 原子高位三激发态 $^2S(m), ^2D(m)$  ( $m=2-7$ )高根系列的 Auger 总宽度(单位为 meV)

共振态	本工作	文献[24]	文献[17]
$2s2s3s\ ^2S(2)$	144.02	137.79	141
$2s2s4s\ ^2S(3)$	135.50	141.44	22
$2s2p3p\ ^2S(4)$	30.56	32.02	8.5
$2s2s5s\ ^2S(5)$	113.27		8.2
$2s2s6s\ ^2S(6)$	28.99		5.0
$2s2p4p\ ^2S(7)$	11.17		1.9
$2s2s3d\ ^2D(2)$	158.94	141.48	97
$2s2p3p\ ^2D(3)$	29.14	23.49	17
$2s2s4d\ ^2D(4)$	156.30		23
$2s2s5d\ ^2D(5)$	153.02		8.1
$2s2s6d\ ^2D(6)$	72.74		3.8
$2s2s7d\ ^2D(7)$	40.82		2.1

$2s2s4s\ ^2S(3) \rightarrow (1s4s\ ^3S + e)$ , Auger 总宽度为 135.50 meV; 对于  $2s2p3p\ ^2S(4)$  共振态, 主要的 Auger 通道为  $2s2p3p\ ^2S(4) \rightarrow (1s5s\ ^3S + e)$ , Auger 总宽度为 30.56 meV. 根据 Auger 宽度, 可以很容易地得到 Auger 跃迁率. 考察 Li 原子高位三激发态高根系列的 Auger 跃迁率对研究原子三激发态的光谱结构和稳定性具有重要的指导意义, 这些数据将为识别实验中的光谱提供有效的理论依据.

## 4. 结 论

Li“洞原子”的高位三激发态的研究需要实验的高分辨率和理论的高精度. 本文利用鞍点变分方法和鞍点复数转动方法, 在考虑了相对论修正和质量极化效应的基础上, 计算了 Li“洞原子”高位三激

发态  $2l2l'nl''^2S(m)$  和  $^2D(m)$  ( $m=2-7$ ) 高根系列的波函数、相对论能量、精细结构. 通过相对论效应的讨论, 本文对  $^2S(7)$ ,  $^2D(6)$  及  $^2D(7)$  的组态进行了重新标定, 同时通过对 Li“洞原子”高位三激发态

$^2D(m)$  的精细结构劈裂的研究, 进一步证明了标定的合理性. 本文计算的 Li 原子三激发态高根系列的 Auger 跃迁宽度数据将为实验中光谱的识别提供有效的理论依据.

- 
- [1] Hughes R H, Kay R B, Weaver L D 1963 *Phys. Rev.* **129** 1630
- [2] Bashkin S 1964 *Nucl. Instrum. Meth.* **28** 88
- [3] Bruch R, Paul G, Andra J, Lipsky L 1975 *Phys. Rev. A* **12** 1808
- [4] Rødbro M, Bruch R, Bisgaard P 1979 *J. Phys. B* **12** 2413
- [5] Agentoft M, Andersen T, Chung K T 1984 *J. Phys. B* **17** L433
- [6] Mannervik S, Short R T, Sonnek D, Trabert E, Moller G, Lodwig V, Heckmann P H, Blanke J H 1989 *Phys. Rev. A* **39** 3964
- [7] Muller A, Hofmann G, Weissbecker B, Stenke M, Tinschert K, Wagner M, Salzborn E 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 758
- [8] Kiernan L M, Kennedy E T, Mosnier J P, Costello J T 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 2359
- [9] Journal L, Cubaynes D, Bizau J M, Moussalami S A, Rouvellou B, Wuilleumier F J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 30
- [10] Diehl S, Cubaynes D, Bizau J M, Journal L, Rouvellou B, Moussalami S A, Wuilleumier F J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3915
- [11] Azuma Y, Koike F, Cooper J W, Nagata T, Kutluk G, Shigemasa E, Wehlitz R, Sellin I A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 2419
- [12] Cubaynes D, Diehl S, Journal L, Rouvellou B, Bizau J M, Moussalami S A, Wuilleumier F J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 2194
- [13] Ahmed M, Lipsky L 1975 *Phys. Rev. A* **12** 1176
- [14] Kiernan L M, Lee M K, Soontag B F, Sladeczek P, Zimmermann P, Kennedy E T, Mosnier J P, Costello J T 1995 *J. Phys. B* **28** L161
- [15] Diehl S, Cubaynes D, Wuilleumier F J, Bizau J M, Journal L, Kennedy E T, Blancard C, Voky L, Faucher P, Hibbert A, Berrah N, Morgan T J, Bozek J, Schlachter A S 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 1241
- [16] Diehl S, Cubaynes D, Kennedy E T, Wuilleumier F J, Bizau J M, Journal L, Voky L, Faucher P, Hibbert A, Blancard C, Berrah N, Morgan T J, Bozek J, Schlachter A S 1997 *J. Phys. B* **30** L595
- [17] Berrington K, Nakazaki S 1998 *J. Phys. B* **31** 313
- [18] Piangos N A, NicoLaidis C A 1993 *Phys. Rev. A* **48** 4142
- [19] Conneely M J, Lipsky L 2000 *Phys. Rev. A* **61** 032506
- [20] Conneely M J, Lipsky L 2002 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **82** 115
- [21] Roy A K 2004 *J. Phys. B* **37** 4369
- [22] Chung K T, Gou B C 1995 *Phys. Rev. A* **52** 3669
- [23] Chung K T, Gou B C 1996 *Phys. Rev. A* **53** 2189
- [24] Zhang Y, Chung K T 1998 *Phys. Rev. A* **58** 1098
- [25] Wang F, Gou B C, Han L H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1685 (in Chinese) [王 菲、苟秉聪、韩利红 2001 物理学报 **50** 1685]
- [26] Davis B F, Chung K T 1984 *Phys. Rev. A* **29** 1878

# Energies, fine structures, and Auger widths of the high-lying triply excited states of ${}^2S(m)$ and ${}^2D(m)$ ( $m=2-7$ ) for the “hollow atom” lithium\*

Sun Yan<sup>†</sup> Gou Bing-Cong Zhu Jing-Jing

(Department of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

(Received 31 August 2009; revised manuscript received 6 January 2010)

## Abstract

The relativistic energies and fine structures of the high-lying triply excited states  $2l2l'nl''{}^2S(m)$  and  ${}^2D(m)$  ( $m=2-7$ ) for the “hollow atom” lithium are studied using the saddle-point variational method and the saddle-point complex-rotation method, including the mass polarization and relativistic corrections. The partial Auger widths and the total widths are also calculated. By the discussion of relativistic effect, we recalibrated the configurations of  ${}^2S(7)$ ,  ${}^2D(6)$  and  ${}^2D(7)$ .

**Keywords:** saddle-point complex-rotation, relativistic correction, fine structure, Auger width

**PACC:** 3150, 3130, 3280D, 3130J

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674015).

<sup>†</sup> E-mail: suenyangu@163.com